

# Abstrakt

Název práce: Rychlé dynamické procesy v roztoku studované pomocí NMR

Autor: Mária Šoltésová

Katedra: Katedra fyziky nízkých teplot, Univerzita Karlova v Praze a Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University

Vedoucí disertační práce: doc. RNDr. Jan Lang, Ph.D., Katedra fyziky nízkých teplot, Univerzita Karlova v Praze a prof. Jozef Kowalewski, Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University

**Abstrakt:** Nukleární magnetická rezonance (NMR) dokáže poskytnout detailní informace o dynamice na molekulární úrovni v širokém oboru časových škál, zejména pokud je doplněna vhodnými teoretickými nástroji. V této práci byla použita sada technik NMR spektroskopie vysokého rozlišení pro výzkum dynamických procesů slabě interagujících molekulárních struktur v roztoku.

Van der Waalsovy interakce hrají důležitou roli v inkluzních komplexech kryptofanu-C s chloroformem nebo dichlormethanem. Tvorba komplexu byla podrobně zkoumána za použití  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR experimentů spolu s kvantově-chemickými výpočty. Byla charakterizována kinetika, termodynamika, jakož i detaily strukturních změn při tvorbě komplexu.

Vnitřní dynamika oligo- a polysacharidů představuje velkou výzvu kvůli možnému provázání lokálního a globálního molekulárního pohybu. Dva modelové oligosacharidy byly použity pro testování nově vyvinuté integrované metody pro popis dynamiky molekul s netriviální vnitřní flexibilitou. Tato metoda spojuje pokročilé teoretické výpočty včetně stochastického modelování, simulací molekulové dynamiky a hydrodynamiky.

Antigenní bakteriální polysacharid z *E. Coli* O91, důležitý z biologického hlediska, byl studován za pomoci selektivního izotopového značení a NMR relaxačních experimentů ve více magnetických polích. Komplexní dynamika polysacharidu je charakterizována konformačními změnami exocyklických skupin cukerných reziduí a omezenou interní flexibilitou polymerního řetězce.

Vodíkové vazby jsou další z důležitých nekovalentních interakcí. Zředěné roztoky ethanolu byly vybrány jako model kapalného systému obsahujícího rozsáhlou síť vodíkových vazeb. Vyvinuli jsme novou metodologii, složenou z NMR difúzních měření, kvantově-chemických výpočtů a hydrodynamického modelování a aplikovali ji pro zjištění průměrné velikosti molekulových klastrů ethanolu za specifických podmínek.

**Klíčová slova:** Nukleární magnetická rezonance, dynamika, ethanol, kryptofan, sacharidy